

## Nou lligand híbrid de pirazol: més flexible, més versàtil

11/2009 - Química.

Un compost de coordinació està format per un àtom metàl·lic o un ió positiu que es troba envoltat de molècules neutres o ions negatius formant enllaços amb ell. Les propietats dels complexos de coordinació estan molt relacionades amb els àtoms donadors que es coordinen al centre metàl·lic. La capacitat coordinant dels lligands de pirazol ha fet que, últimament, s'utilitzin també en la captació i extracció d'ions metàl·lics en solucions aquoses. El nou lligand híbrid pirazòlic estudiat en aquest treball és altament flexible i versàtil, ja que és capaç d'acomodar-se a una gran varietat de geometries, la qual cosa el converteix en un lligand realment interessant ja que en un futur pot tenir aplicacions en catàlisi o ser estudiat com a model en el plegament de proteïnes.

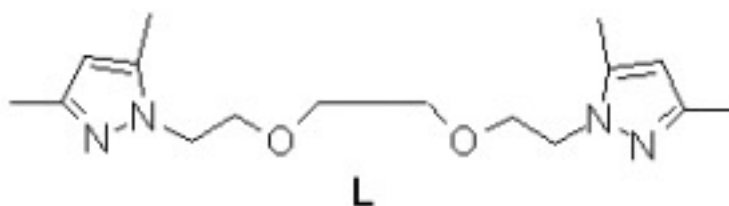


Figura 1.- Esquema del lligand L.

La química de coordinació és la branca de la química inorgànica que s'encarrega, entre altres, de l'estudi de la formació, propietats i reactivitat dels compostos de coordinació. Un compost de coordinació (també conegut com "complex") està format per un àtom metàl·lic o un ió positiu que es troba envoltat de molècules neutres o ions negatius formant enllaços amb ell. Generalment, el metall sol ser un metall de transició. Les molècules neutres o ions negatius es denominen lligands i formen enllaços amb el metall a través dels seus parells d'electrons lliures; aquests enllaços són covalents de tipus datiu (els dos electrons de l'enllaç provenen només d'un dels àtoms implicats).

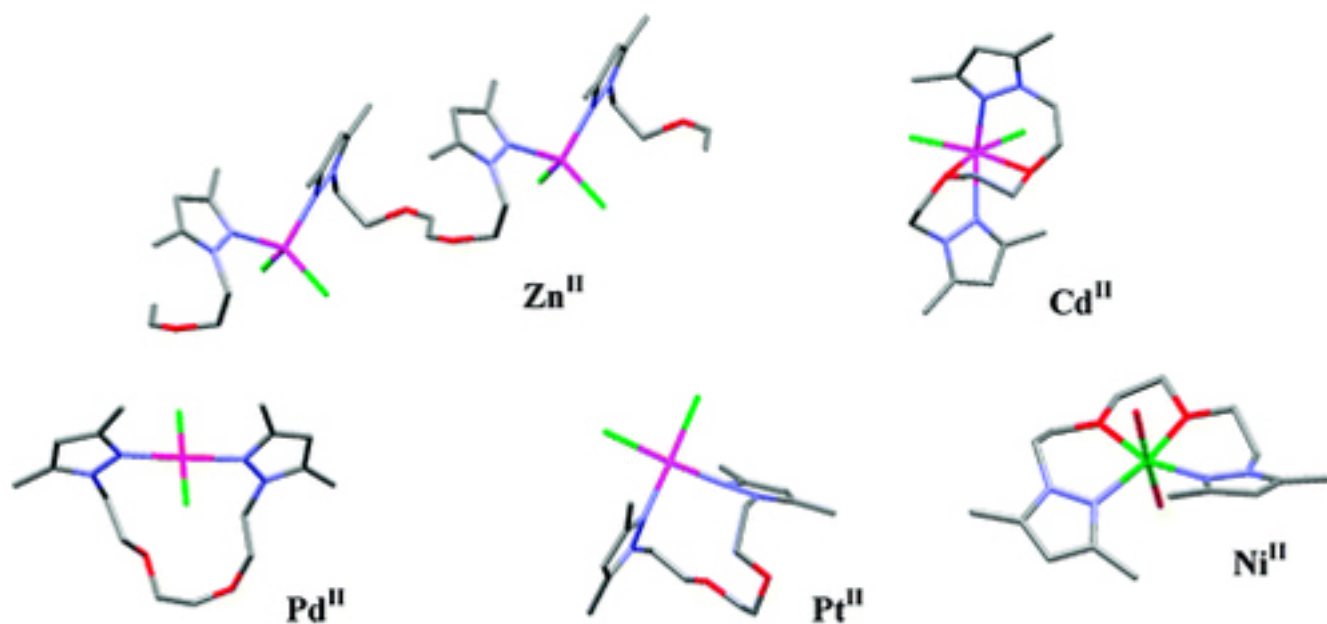
Una de les vessants més interessants de la química de coordinació és el disseny i síntesi de lligands funcionalitzats que formen complexos metàl·lics amb propietats específiques. Aquestes propietats estan molt relacionades amb els àtoms donadors que es coordinen al centre metàl·lic. Si els àtoms donadors d'un lligand són iguals, es diuen lligands homofuncionals, mentre que si aquests són diferents se'ls denomina lligands híbrids. Depenent de la presència d'un àtom o un altre les propietats i aplicacions del complex de coordinació varien.

El disseny de lligands híbrids, i en particular, els lligands derivats del pirazol, s'utilitzen en agroquímica com a pesticides, herbicides i fertilitzants. En la indústria tèxtil aquests també s'utilitzen com a colorants i en el sector farmacèutic com a principis actius, amb propietats antitumorals, antioxidants o antiinflamatoris. La capacitat coordinant d'aquests lligands ha fet que últimament també s'utilitzin en la captació i extracció d'ions metàl·lics en solucions aquoses.

En aquest article s'ha descrit la síntesi i caracterització d'un nou lligand híbrid pirazòlic (L) (Figura 1) així com l'estudi de la seva coordinació enfront de diversos metalls de transició com per exemple,  $Zn^{II}$ ,  $Cd^{II}$ ,  $Hg^{II}$ ,  $Ni^{II}$ ,  $Pd^{II}$  i  $Pt^{II}$ . S'ha pogut comprovar que aquest lligand és altament flexible i versàtil ja que és capaç d'acomodar-se a una gran varietat de geometries (tetraèdrica, cis i trans-planoquadrada, apical i equatorial-octaèdrica) i estructures (polimèrica, monomèrica i dimèrica) (Figura 2). Aquest fet és realment interessant ja que en un futur el lligand L pot tenir aplicacions en catàlisi o ser estudiat com model en el plegament de proteïnes.

A més, d'altra banda, al tractar-se d'un lligand potencialment tetradentat i contenir dos àtoms de nitrogen i dos àtoms d'oxigen (Figura 1), s'ha observat que en estat sòlid aquests heteroàtoms juguen un paper crucial en la formació d'enllaços intermoleculars (principalment enllaços d'hidrogen) provocant així, estructures tridimensionals d'alt interès per les seves múltiples aplicacions. Per exemple, recentment diversos complexos pirazòlics estan sent investigats en el camp de la química supramolecular (host-guest chemistry).

En conseqüència, la naturalesa híbrida del lligand L juntament amb la seva flexibilitat fa que aquest pugui ser considerat com un excel·lent lligand per al seu ús en la química de coordinació i la seva posterior aplicació en diversos camps.



Josefina Pons, Miguel Guerrero

Departament de Química

"Variable Coordination Behavior of New Hybrid Pyrazole Ligand: Synthesis and Characterization of Several Zn-II, Cd-II, Hg-II, Pd-II, Pt-II, and Ni-II Complexes". Guerrero, M; Pons, J; Parella, T; Font-Bardia, M; Calvet, T; Ros, J. INORGANIC CHEMISTRY, 48 (18): 8736-8750 SEP 21 2009.